

Difficultés d'import et propositions d'évolution pour ...



## FAME, c'est:

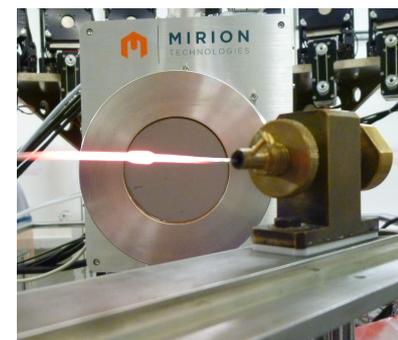
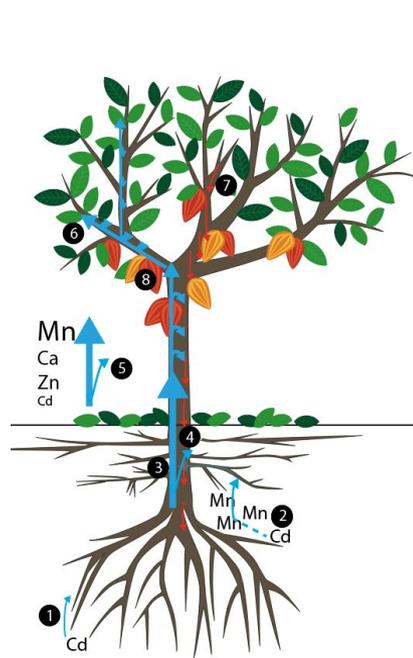
- 2 lignes de lumière de l'ESRF (rayons X)
- 400 utilisateurs par an
- 50 expériences par an
  - ~ 10 spectres de référence
  - autant d'échantillons
    - Sciences de la Terre
    - Biochimie
    - Matériaux

FAME ∈ ESRF → Data Portal

**FAME**  
649 spectra

## SSHAD/FAME, c'est:

- 86 EXPERIMENTALISTS
- 674 SPECTRA
- 380 SAMPLES



# Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

## 1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

# Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

## 1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

## 2/ Compléments d'information :

- possibilité d'**associer des fichiers (cif, pdf)**, aux phases, aux échantillons, aux expériences; **input files** des spectres simulés  
(cela existe peut-être déjà sans qu'on le sache).

# Nos besoins / souhaits

(par ordre de priorité)

## 1/ Simplification de l'import:

- en premier lieu pour la **création des phases** (minimum de détails, liens vers des bases existantes : COD, Materials Project, Data Terra ?) + **import autonome** par l'utilisateur.
- si possible, **citation des publis** avec simplement le DOI, sans besoin de les importer.
- **Experimentalists** : contraintes des dates de contrats

## 2/ Compléments d'information :

- possibilité d'**associer des fichiers (cif, pdf)**, aux phases, aux échantillons, aux expériences; **input files** des spectres simulés  
(cela existe peut-être déjà sans qu'on le sache).

## 3/ Configuration de l'export:

- Pour une utilisation « par l'**homme** », à la suite d'une recherche donnant N spectres, récupération de **N fichiers csv avec les données** = utilisation rapide et recherche ultérieure dans les métadonnées
- Pour une utilisation « par une **machine** », toutes les **méta-données** d'un spectre **dans 1 seul fichier** (xml?) puis éventuellement converties selon le standard Nexus par les gestionnaires de sshade/fame.

# Ce qui se passe de notre côté

## 1/ Collecte des métadonnées

- L'ESRF travaille sur la collecte **automatique** des métadonnées du sample (au standard Nexus) depuis les déclarations des utilisateurs.
  - utilisation possible pour pré-remplir les xml.

# Ce qui se passe de notre côté

## 1/ Collecte des métadonnées

- L'ESRF travaille sur la collecte **automatique** des métadonnées du sample (au standard Nexus) depuis les déclarations des utilisateurs.
  - utilisation possible pour pré-remplir les xml.

## 2/ Interactions avec données SSHADE/FAME

- Référencement de SSHADE/FAME sur **International XAFS DB Portal** (Japon) :
  - <https://ixdb.jxafs.org/>
  - sur la base d'une liste à un instant t (export D.A.) puis intégration à la main (Japon)
    - **Question** : comment mettre à jour cette liste périodiquement ?

### International XAFS DB Portal

#### Links for Molybdenum(IV) oxide

<https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/7p88ck21q> (SPring-8)  
<https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/k930c023q> (SPring-8)  
[https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM\\_PA\\_20180702\\_001](https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_PA_20180702_001) (SSHADE/FAME)

#### Direct data download

[https://mdr.nims.go.jp/download\\_all/7p88ck21q.zip](https://mdr.nims.go.jp/download_all/7p88ck21q.zip) (SPring-8)  
[https://mdr.nims.go.jp/download\\_all/k930c023q.zip](https://mdr.nims.go.jp/download_all/k930c023q.zip) (SPring-8)

#### Related crystal structures

[P 1 21/c 1](#)  
[P 42/m n m](#)  
[P n m a](#)

#### Related phase diagram

[CPDDB](#) (NIMS MatNavi [registration](#))

#### Related properties

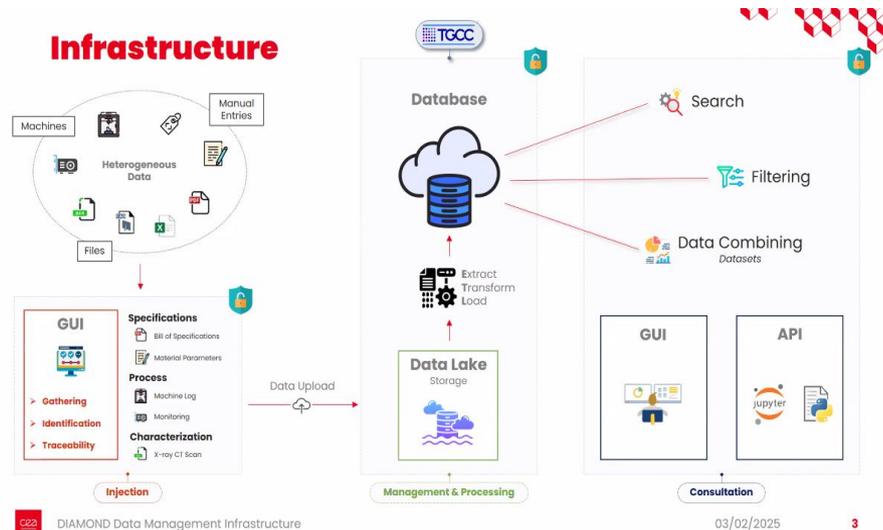
[Materials project for MoO2](#)  
[AtomWork](#) (NIMS MatNavi [registration](#))



Merci

# Positionnement par rapport à d'autres bases de données

- FAME participe au **projet Diamond**



- FAME participe au réseau **REGEF**

